

جلسه نهم

مکانیک آماری

محمد رضا مظفری
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه قم
اسفند ۹۸

آنسامبل کانونیک

* سیستم دو حالت

— Δ
— 0

$$Z = 1 + e^{-\beta\Delta}$$

$$Z = e^{-\beta F} \Rightarrow F = -k_B T \ln Z$$

$$F = -k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta})$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right) = k_B \ln(1 + e^{-\beta\Delta}) + \frac{\Delta}{T} \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

$$\xrightarrow{\times T} TS = k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta}) + \Delta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم دو حالتہ

— Δ
— 0

$$F = -k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta})$$

$$TS = k_B T \ln(1 + e^{-\beta\Delta}) + \Delta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

$$TS = -F + \Delta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}, \quad TS = -F + U$$

$$U = \Delta \frac{e^{-\beta\Delta}}{1 + e^{-\beta\Delta}}$$

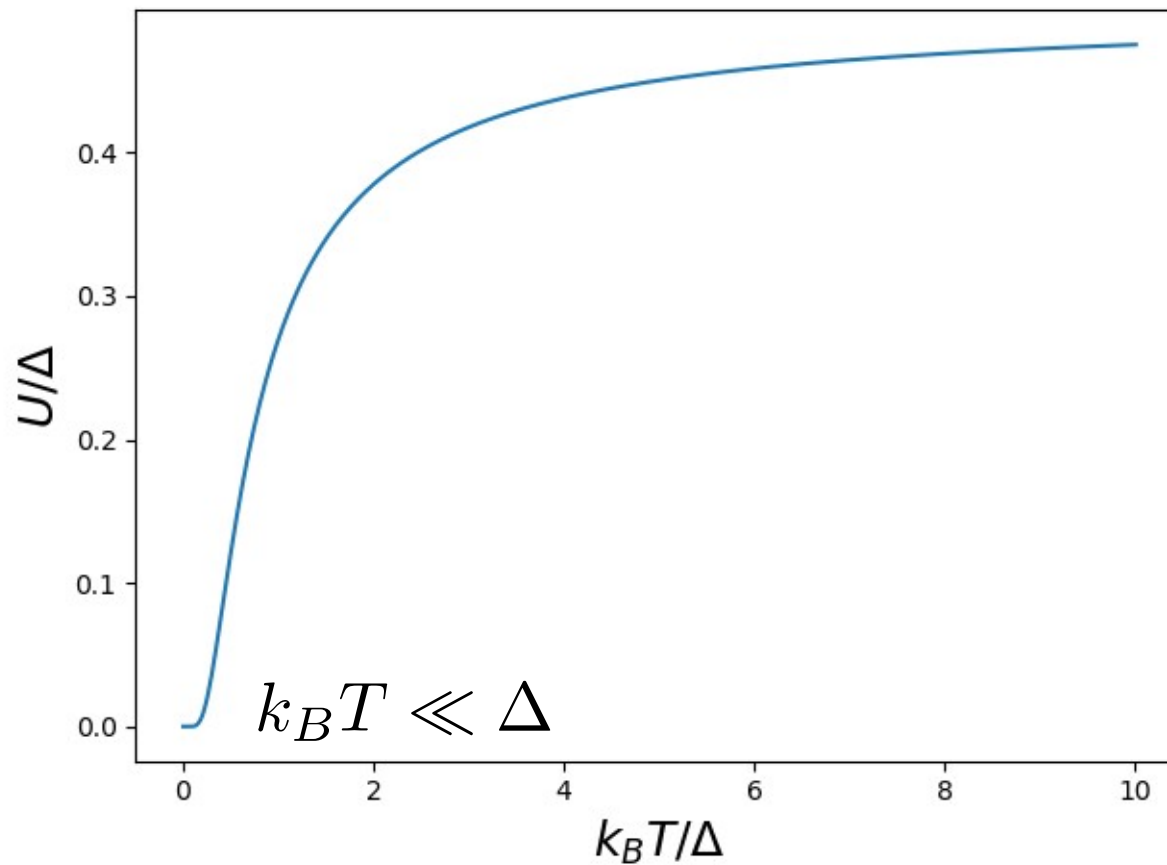
$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = k_B \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{-\beta\Delta}}{(1 + e^{-\beta\Delta})^2}$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم دو حالتی

$k_B T \gg \Delta$

— Δ
— 0



آنسامبل کانونیک

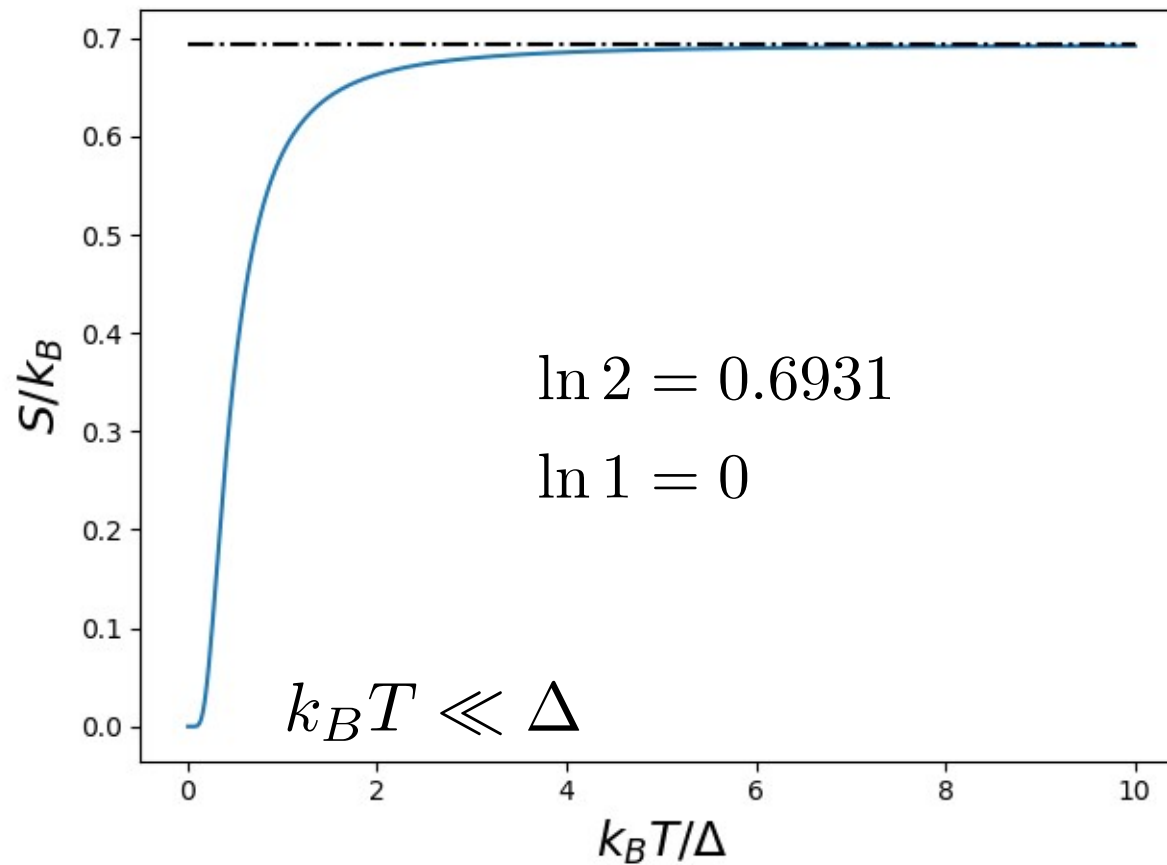
* سیستم دو حالت

$$S/k_B = \ln \Omega$$

$$k_B T \gg \Delta$$

— Δ

— 0

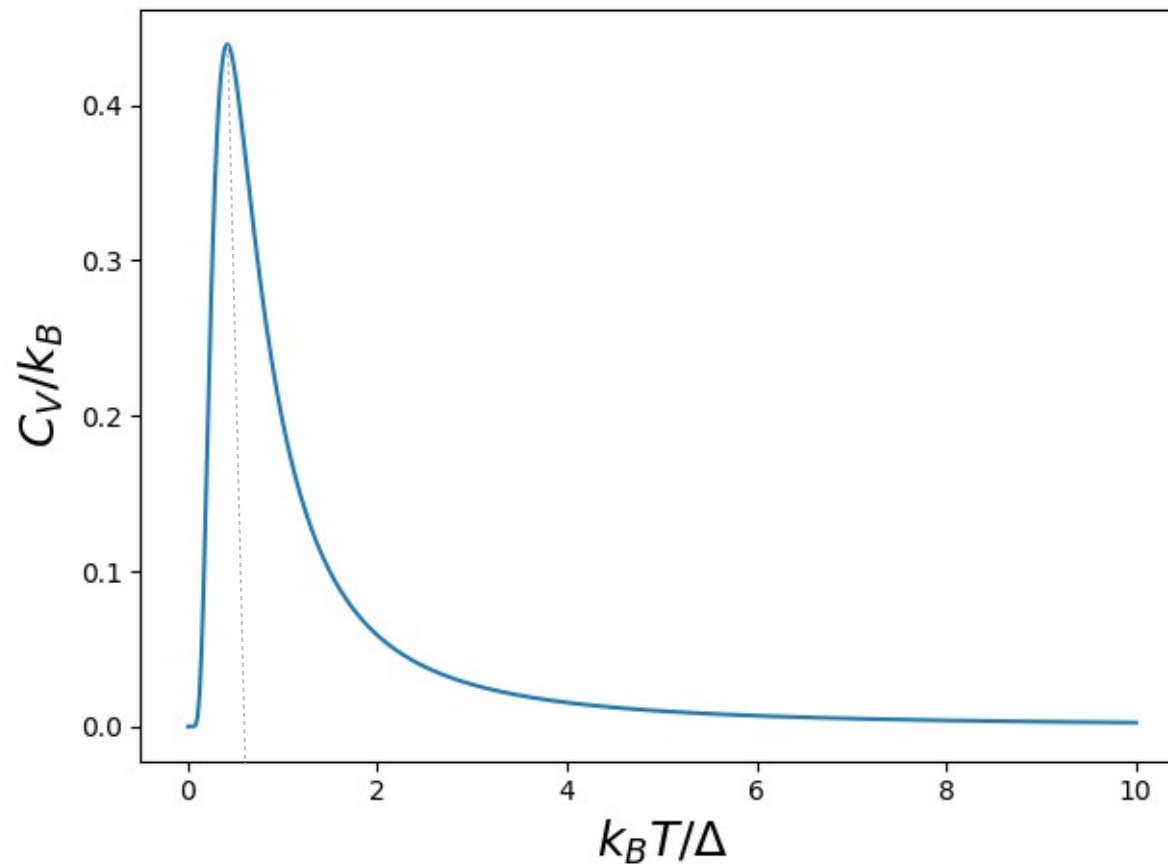


آنسامبل کانونیک

* سیستم دو حالتی

Schottky anomaly

— Δ
— 0



آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالت

— $(N - 1)\Delta$

⋮

— 2Δ

$$Z = 1 + e^{-\beta\Delta} + e^{-2\beta\Delta} + \dots + e^{-(N-1)\beta\Delta}$$

— Δ

— 0

$$x \ll 1: \quad 1 + x + x^2 + \dots + x^n = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}$$

$$n \rightarrow N - 1, \quad x = e^{-\beta\Delta}$$

$$Z = \frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}}$$

$$F = -k_B T \ln \left(\frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right) = -k_B T [\ln(1 - e^{-N\beta\Delta}) - \ln(1 - e^{-\beta\Delta})]$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالت

$(N - 1)\Delta$
 \vdots
 2Δ
 Δ
 0

$$F = -k_B T [\ln(1 - e^{-N\beta\Delta}) - \ln(1 - e^{-\beta\Delta})]$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)$$

$$S = k_B \ln \left(\frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right) - \frac{\Delta}{T} \left(\frac{N e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-N\beta\Delta}} \right) + \frac{\Delta}{T} \left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right)$$

$$\xrightarrow{\times T} ST = k_B T \ln \left(\frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right) - \Delta \left(\frac{N e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-N\beta\Delta}} \right) + \Delta \left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right)$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالتہ

$$F = -k_B T \ln \left(\frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right)$$

$$ST = k_B T \ln \left(\frac{1 - e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right) - \Delta \left(\frac{N e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-N\beta\Delta}} \right) + \Delta \left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right)$$

$$ST = -F - \Delta \left(\frac{N e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-N\beta\Delta}} \right) + \Delta \left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right)$$

$$U = -\Delta \left(\frac{N e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-N\beta\Delta}} \right) + \Delta \left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right)$$

آنسامبل کانونیک

$$U = -\Delta \left(\frac{N e^{-N\beta\Delta}}{1 - e^{-N\beta\Delta}} \right) + \Delta \left(\frac{e^{-\beta\Delta}}{1 - e^{-\beta\Delta}} \right) \quad * \text{سیستم } N \text{ حالت}$$

$$U = \Delta \left(\frac{N}{1 - e^{N\beta\Delta}} \right) - \Delta \left(\frac{1}{1 - e^{\beta\Delta}} \right)$$

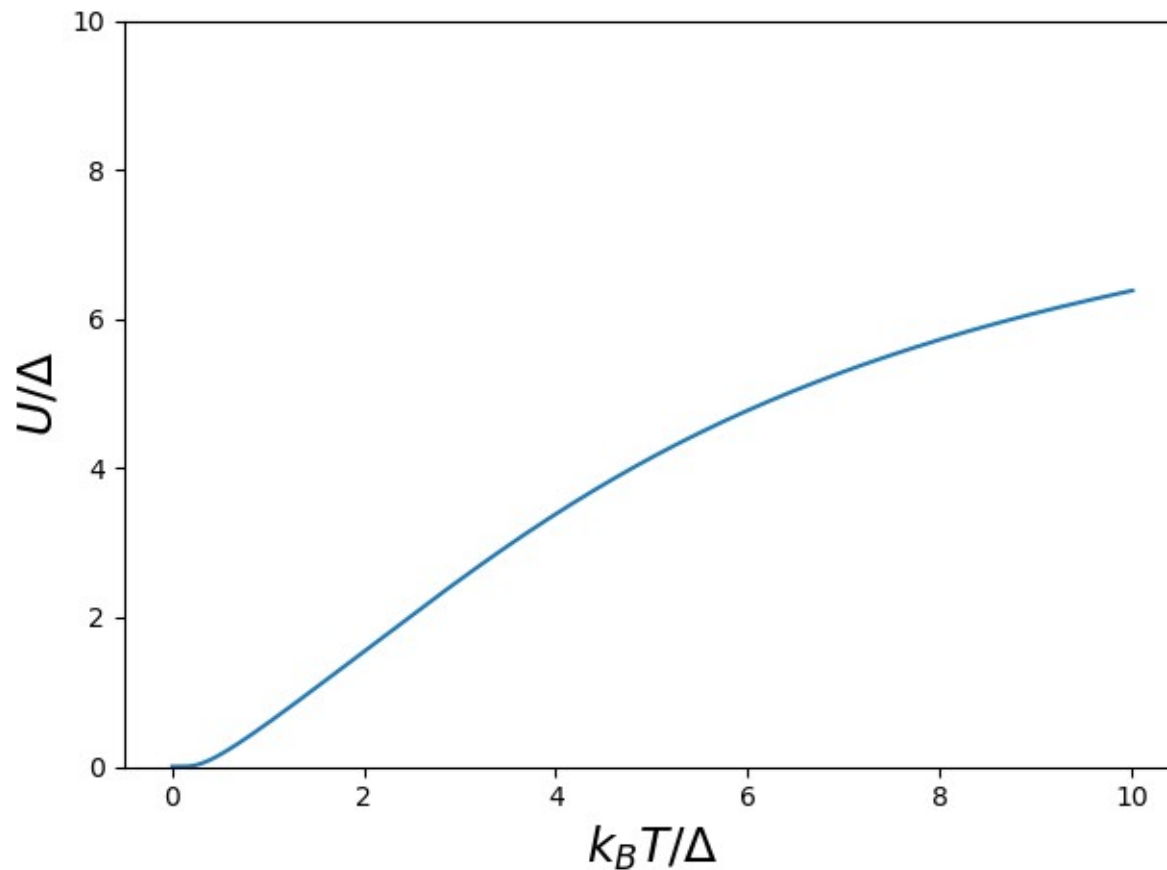
$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$C_V = -k_B(\beta\Delta)^2 \left[\frac{N^2 e^{N\beta\Delta}}{(1 - e^{N\beta\Delta})^2} - \frac{e^{\beta\Delta}}{(1 - e^{\beta\Delta})^2} \right]$$

آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالت

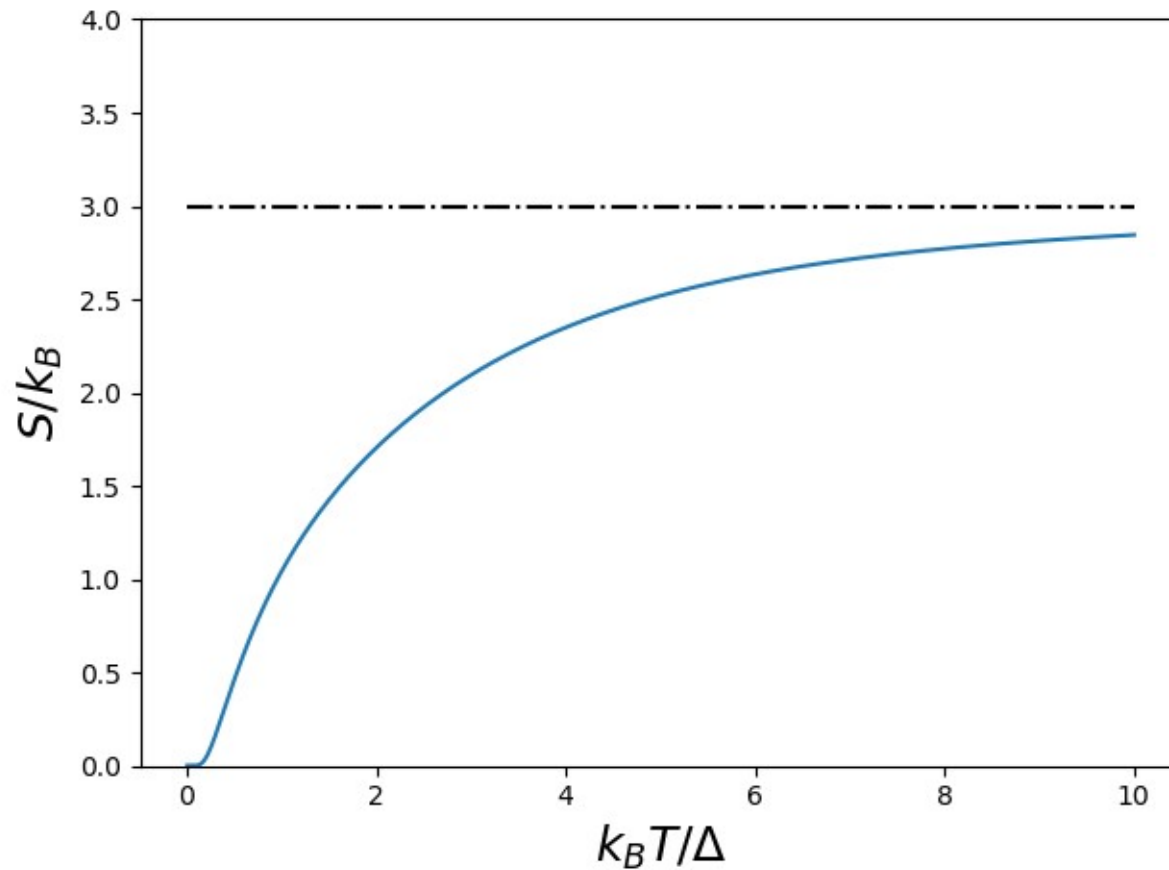
$$N = 20$$



آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالت

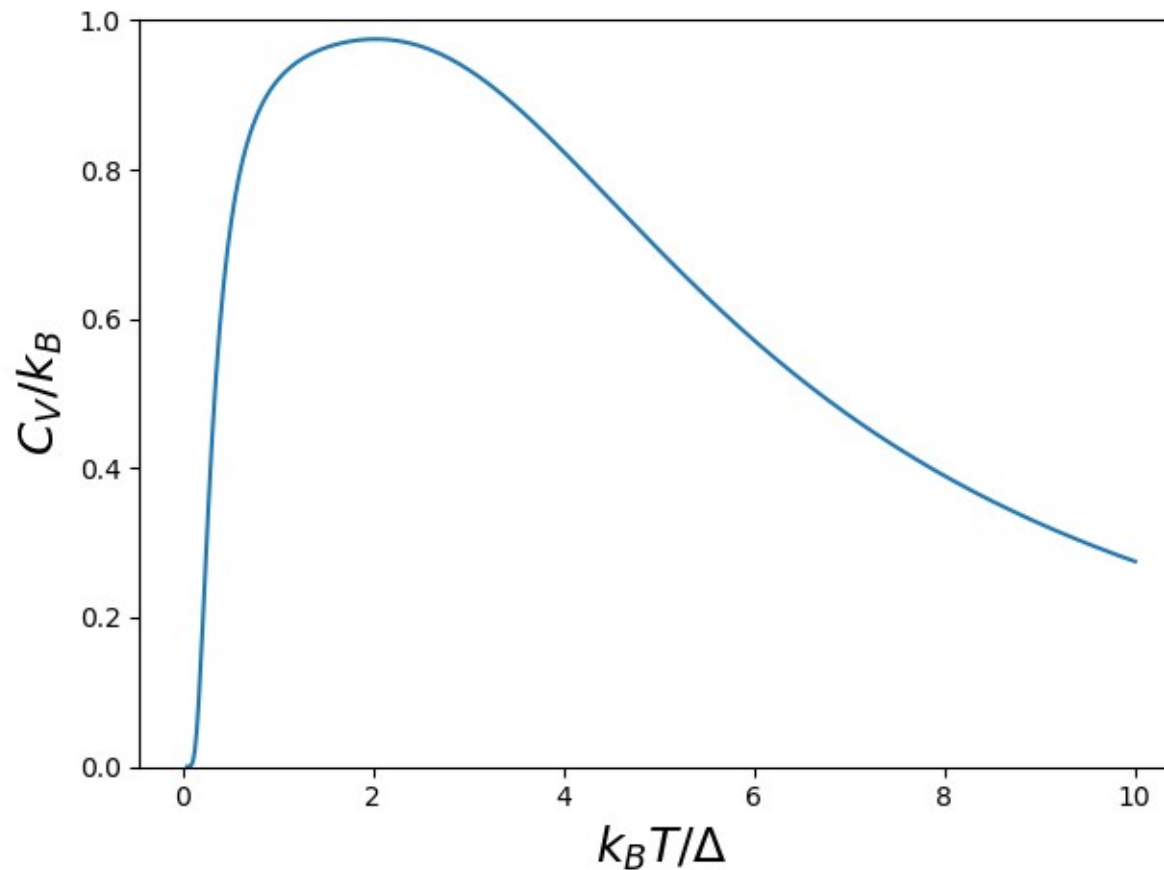
$$N = 20$$



آنسامبل کانونیک

* سیستم N حالت

$$N = 20$$



آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده

⋮

———— $5\hbar\omega/2$

———— $3\hbar\omega/2$

———— $\hbar\omega/2$

$$\epsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$Z = \sum_k e^{-\beta\epsilon_k} = \sum_k e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)}$$

$$Z = \sum_k e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_k e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده

$$\epsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

⋮

———— $5\hbar\omega/2$

———— $3\hbar\omega/2$

———— $\hbar\omega/2$

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$F = -k_B T \ln Z = k_B T \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} + \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \right)$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right) = -k_B \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) + \frac{\hbar\omega}{T} \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$U = F + TS = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده

$$\epsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

⋮

———— $5\hbar\omega/2$

———— $3\hbar\omega/2$

———— $\hbar\omega/2$

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

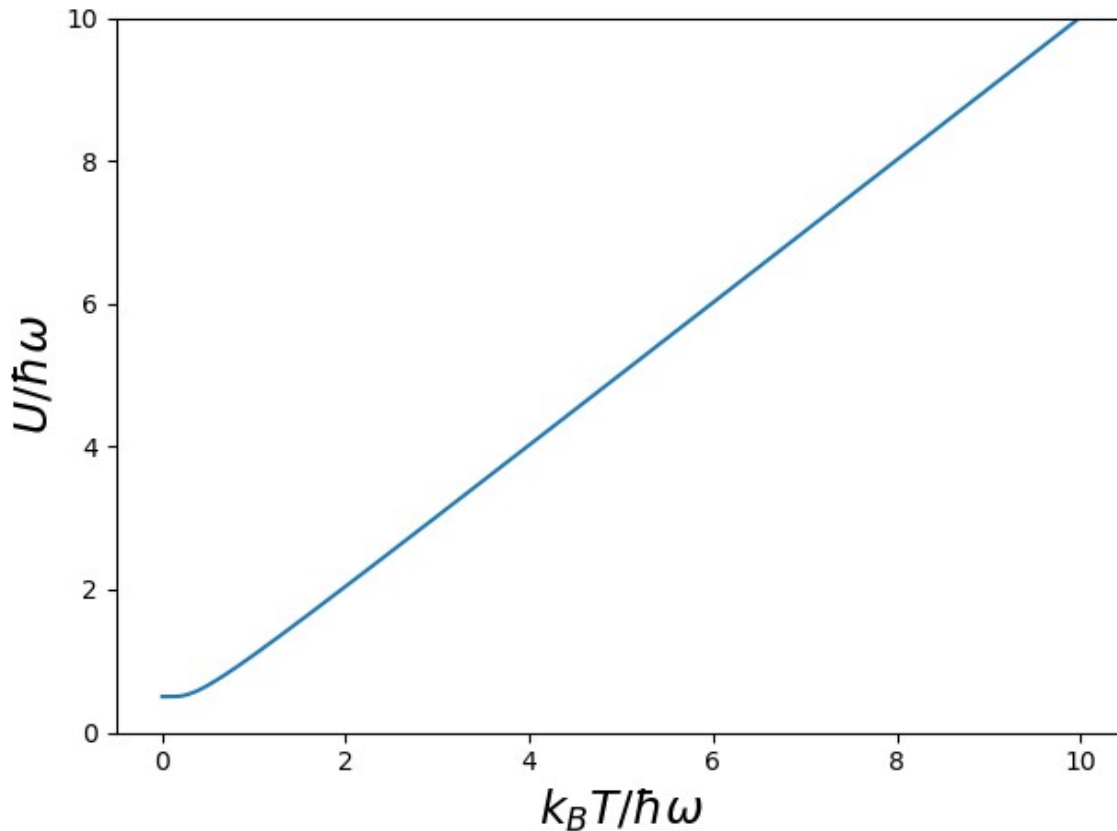
$$U = F + TS = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta}$$

$$C_V = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{-\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) - \hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega} e^{-\beta\hbar\omega}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^2} = k_B (\beta\hbar\omega)^2 \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^2}$$

آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده



$$k_B T \gg \hbar\omega \Rightarrow \beta\hbar\omega \ll 1$$

$$U = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right)$$

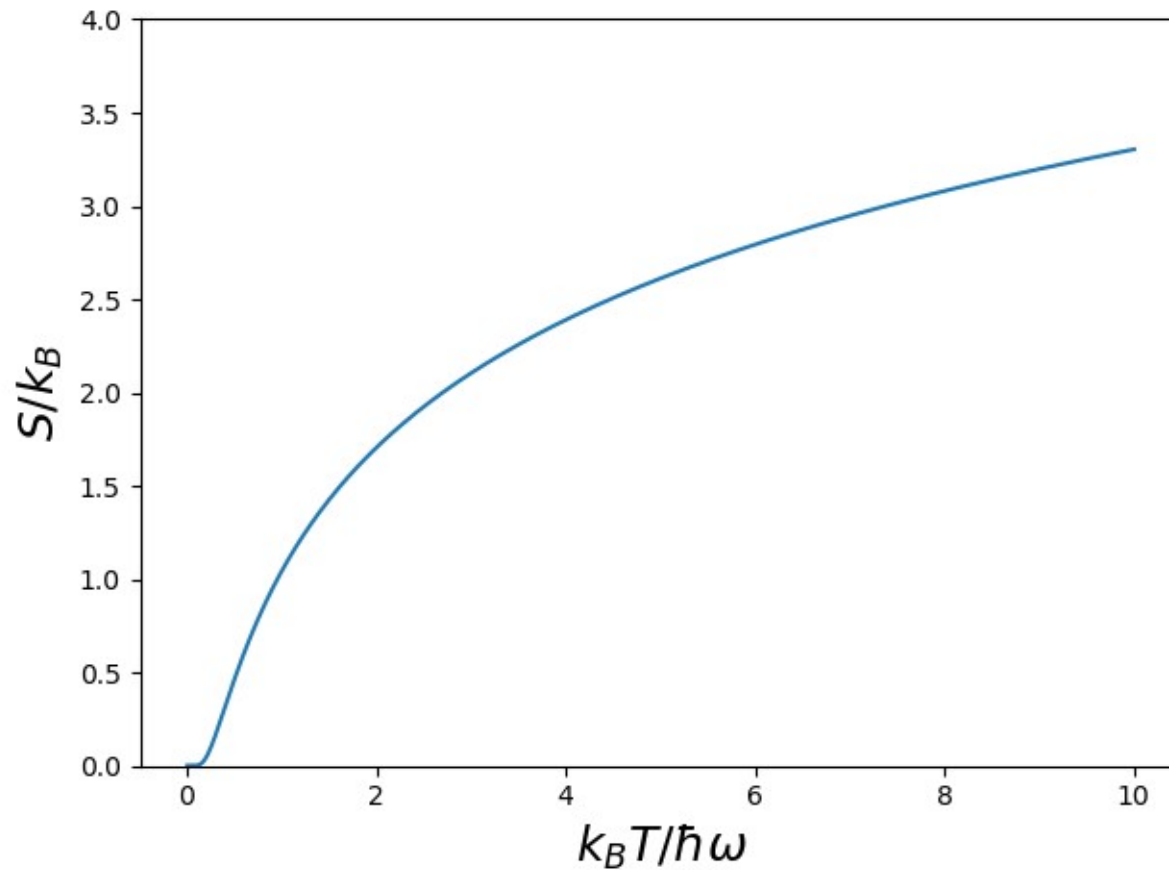
$$U = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right)$$

$$U = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{(1 + \beta\hbar\omega + \dots) - 1} \right)$$

$$U \simeq \frac{\hbar\omega}{2} + k_B T$$

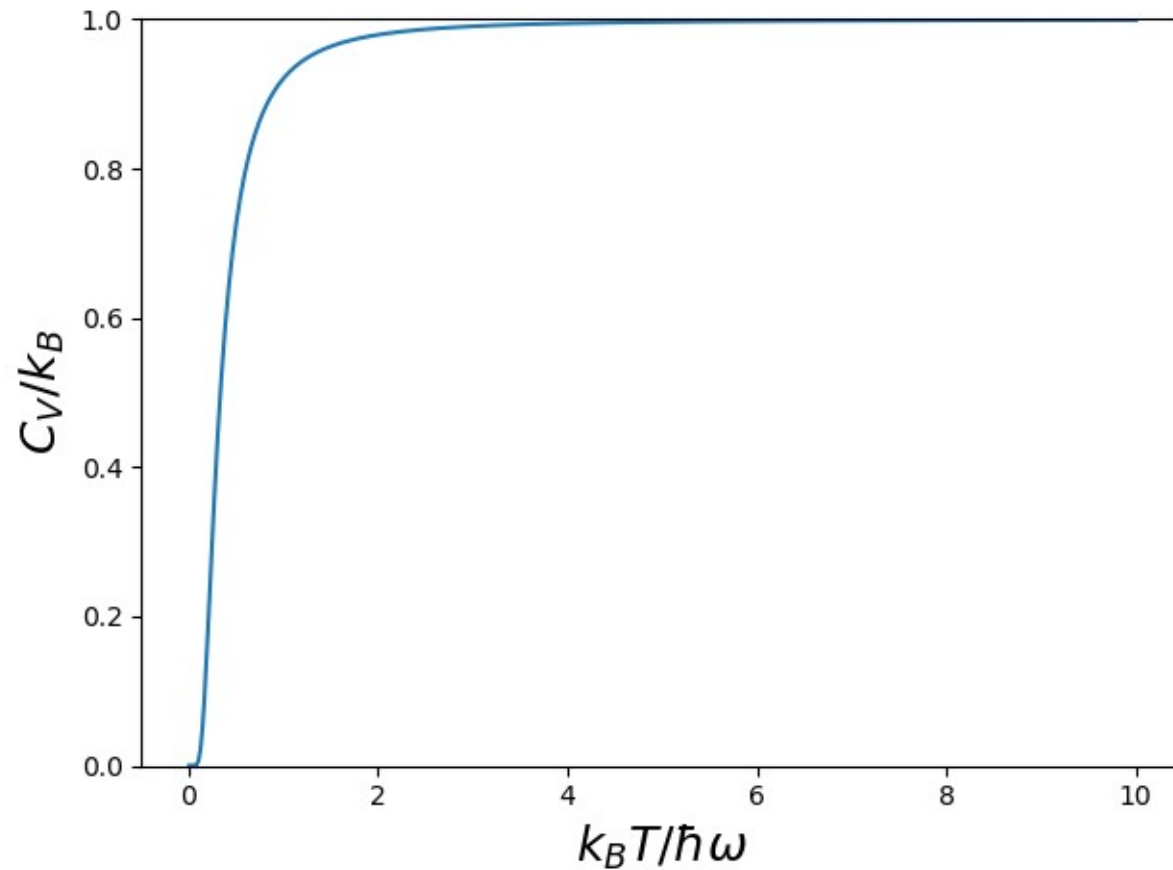
آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده



آنسامبل کانونیک

* نوسانگر ساده



$$k_B T \gg \hbar \omega \Rightarrow \beta \hbar \omega \ll 1$$

$$U \simeq \frac{\hbar \omega}{2} + k_B T$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} \simeq k_B$$

$$\frac{C_V}{k_B} \rightarrow 1$$

آنسامبل کانونیک

* اگر $k_B T$ بسیار کمتر از فاصله بین پایین‌ترین تراز انرژی و اولین تراز برانگیخته باشد، سیستم در پایین‌ترین تراز قرار خواهد گرفت.

* اگر مجموعه‌ای محدود از ترازهای انرژی وجود داشته باشد و $k_B T$ بسیار بزرگتر از فاصله انرژی بین پایین‌ترین و بالاترین تراز باشد، در این صورت هر تراز انرژی با احتمال برابر اشغال می‌شود.

Δ
0

آنسامبل کانونیک

* اگر نردبان نامتناهی از سطوح وجود داشته باشد و $k_B T$ بسیار بزرگتر از فاصله انرژی بین ترازهای مجاور باشد، در این صورت میانگین انرژی بطور خطی با T افزایش می یابد و نتیجه مطابق با قانون همپاری بدست می آورد.

∞

\vdots

———— $5\hbar\omega/2$

———— $3\hbar\omega/2$

———— $\hbar\omega/2$